結晶塑性 Phase-Field モデルの構築と
塑性変形を伴う微視組織形成過程のシミュレーション*山中晃徳^{*1}, 高木知弘^{*2}, 冨田佳宏^{*3}Development of Crystal Plasticity Phase-Field Model and Simulation of
Microstructure Evolution with Plastic DeformationAkinori YAMANAKA^{*4}, Tomohiro TAKAKI and Yoshihiro TOMITA^{*4} Graduate School of Science and Engineering, Tokyo Institute of Technology,
2-12-1 Ookayama, Meguro-ku, Tokyo, 156-8552 Japan

In this study, a new crystal plasticity phase-field model is developed by coupling the phase-field microelasticity theory and the crystal plasticity theory. We first conduct the simulation of uniaxial tensile loading of a single crystal and confirm the developed model can describe the elastic and plastic deformation behaviors depending on crystal orientation. Then, the present model is applied to the simulation of the growth of single and multiple precipitates with dilatational transformation strain. The simulation results show that the high stress region near the interface migrates with the growth of the precipitates. In the growth of precipitates with plastic deformation, the high stress near the interface decreases by the plastic deformation. Furthermore, it is revealed that the plastic deformation concentrates along the direction that shear stress on the slip plane becomes maximum. Thus, the distribution of the plastic strain depends on the crystal orientation of the parent phase. The simulation of the growth of multiple precipitates also demonstrates that the plastic strain produces the residual stress in the final polycrystalline structure. According to these simulation results, the developed phase-field model offers advantage to describe not only the microstructure evolution during the phase transformation, but also the elastic and plastic deformation behaviors on the basis of the crystal plasticity theory.

Key Words: Phase-Field Method, Crystal Plasticity Theory, Microstructure Evolution, Plastic Deformation

1. 緒 言

近年, 強力な組織形成シミュレーション手法として注目されている Phase-Field 法⁽¹⁾は, 界面の逐次追跡を必要とせず, 組織の全自由エネルギーに基づき組織発展解析を可能とする連続体モデルであり, 凝固, 粒成長, 再結晶, 相変態における組織発展などに適用されている^{(2)~(4)}. 特に最近では, Phase-Field 法を用いて材料の塑性変形挙動を解析する研究^{(5) (6)}も行われており, 微視組織発展とそれに伴う弾塑性変形挙動を表現する, 弾塑性 Phase-Field モデルが提案されている. Uehara らは, 組織発展, それに伴う熱, 応力変化の連成解析を可能とする Phase-Field モデルを提案し, 粒成長過程における温度場の変化, 塑性ひずみの発生, それによる

残留応力の有限要素解析を行っている⁽⁷⁾. また, Guo らは塑性ひずみを Phase-Field 法における秩序変数として定義し, 塑性ひずみの時間発展方程式を解くことで, ジルコニウム中の水素化合物成長に伴う弾塑性変形挙動の解析を行っている^{(8) (9)}. さらに, 著者らは Guo らのモデルを用いてマルテンサイト変態における塑性緩和挙動を解析し, 成長するマルテンサイト相周りの塑性ひずみ分布を明らかにした⁽¹⁰⁾. ただし, 上記の弾塑性 Phase-Field モデルでは, 塑性ひずみの評価においてすべり系を考慮していないため, 塑性変形による結晶方位や転位密度の変化を解析することはできない. Phase-Field 法を用いた組織形成シミュレーションにおいて, 組織形成に伴う塑性変形で生じる結晶方位や転位密度の変化を評価することができれば, より詳細かつ定量的に組織形成過程を解析できるものと考えられる. 例えば, 著者らが行ってきたマルテンサイト組織形成シミュレーションにおいては, マルテンサイト相および周囲の母相における結晶方位変化や転位密度変化を評価することで, レンズマルテンサイトやラスマル

* 原稿受付 2009 年 5 月 13 日.

^{*1} 正員, 東京工業大学大学院理工学研究科(☎ 156-8552 東京都目黒区大岡山 2-12-1).^{*2} 正員, 京都工芸繊維大学大学院自然科学研究科(☎ 606-8585 京都市左京区御所海道町).^{*3} 正員, フェロー, 福井工業大学工学部(☎ 910-8505 福井市学園 3-6-1).

E-mail: ayamanaka@mes.titech.ac.jp

テンサイトといったマルテンサイト組織の形態変化機構の解明に有益な情報を与えることができる。

そこで本研究では、相変態による組織発展と塑性変形ならびに塑性変形による結晶方位変化や転位密度変化を解析可能とするために、Khachaturyan の Phase-Field Microelasticity(PFM) 理論⁽¹¹⁾および結晶塑性理論に基づく結晶塑性 Phase-Field モデルを提案する。そして、構築した結晶塑性 Phase-Field モデルを用いて単結晶の引張り変形および固相変態による析出相の成長シミュレーションを行い、相変態による組織形成および結晶方位に依存した塑性変形挙動を評価可能であることを示す。なお、本研究では対象とする材料を特定しないが、金属材料における相変態を想定しており、母相を β 相、析出相を α 相と呼ぶこととする。

2. 結晶塑性 Phase-Field モデル

2.1 化学的自由エネルギーおよび勾配エネルギー

PFM 理論および結晶塑性理論を用いて、結晶塑性 Phase-Field モデルの定式化を行う。Phase-Field 法では、系の全自由エネルギーを定義し、その全自由エネルギーが最小化する方向に組織発展が生じるとの仮定に基づき、支配方程式を導出する。

本研究では、系の全自由エネルギー G_{total} を化学的自由エネルギー G_{chem} 、勾配エネルギー G_{grad} 、弾性ひずみエネルギー G_{elast} の和で表される、次式の Ginzburg-Landau 型の Gibbs の自由エネルギー汎関数で評価する。

$$G_{total} = G_{chem} + G_{elast} + G_{grad} \quad (1)$$

ここで、化学的自由エネルギー G_{chem} は、次式に示す ϕ_i の多項展開式で表現する⁽¹²⁾。

$$G_{chem} = \int_V \Delta f \left\{ \frac{A}{4} \sum_{i=1}^N \phi_i^2 - \frac{B}{2} \sum_{i=1}^N \phi_i^3 + \frac{C}{12} \left(\sum_{i=1}^N \phi_i^2 \right)^2 \right\} dV \quad (2)$$

ここで、 ϕ_i ($i = 1, 2, 3, \dots, N$) は析出相である α 相の存在確率をあらわす秩序変数、すなわち phase field であり、 N 個ある α 相の結晶粒のうち、ある i 番目の α 相内で $\phi_i = 1$ 、それ以外の α 相と β 相では $\phi_i = 0$ で定義される。また、 α 相と β 相の界面領域においては、 ϕ_i は滑らかに変化する。 Δf は α 相生成のための変態駆動力の大きさである。 A, B, C は展開係数であり、本研究では化学的自由エネルギーが $\phi_i = 1$ で最小値となるように $A = 0.15, B = 3A + 12, C = 2A + 12$ と仮定する。

次に、勾配エネルギーは次式で表わされる。

$$G_{grad} = \int_V \frac{\kappa}{2} \sum_{i=1}^N |\nabla \phi_i|^2 dV \quad (3)$$

ここで、 κ は勾配エネルギー係数である。

2.2 弾性ひずみエネルギー

系の弾性ひずみエネルギーは、マイクロメカニクス理論を一般化した Khachaturyan の PFM 理論⁽¹¹⁾により評価する。本研究では、固有ひずみ (stress-free strain) ϵ_{ij}^0 を変態ひずみ ϵ_{ij}^{trans} と結晶塑性理論より導出される塑性ひずみ ϵ_{ij}^p の和と定義する。PFM 理論によれば固有ひずみ ϵ_{ij}^0 を有する系の弾性ひずみエネルギーは次式で表される⁽¹¹⁾。

$$\begin{aligned} G_{el} &= \frac{1}{2} \int_V C_{ijkl} \epsilon_{kl}^{el} \epsilon_{ij}^{el} dV \\ &= \frac{1}{2} \int_V C_{ijkl} (\epsilon_{kl}^c - \epsilon_{kl}^0) (\epsilon_{ij}^c - \epsilon_{ij}^0) dV \\ &= \frac{1}{2} \int_V C_{ijkl} \epsilon_{kl}^0 \epsilon_{ij}^0 dV \\ &\quad + \int_V \left[-\sigma_{ij}^0 \epsilon_{ij}^c + \frac{1}{2} C_{ijkl} \epsilon_{ij}^c \epsilon_{kl}^c \right] dV \end{aligned} \quad (4)$$

ここで、 C_{ijkl} は弾性定数テンソル、 ϵ_{ij}^{el} は弾性ひずみ、 ϵ_{ij}^c は全ひずみ、 σ_{ij}^0 は $\sigma_{ij}^0 = C_{ijkl} \epsilon_{kl}^0$ で表される。PFM 理論では、固有ひずみ ϵ_{ij}^0 は微視領域においては不均質であるが、巨視領域においては、均質であると仮定している。式 (4) の右辺第 3 式の第 1 項は Eshelby サイクルにおいて、相変態した α 相に外力を作用させて、相変態で生じた固有ひずみ ϵ_{ij}^0 だけ形状変化させるために必要なエネルギー、第 2 項はその α 相を母相に戻し、外力を取り除いたときに、 α 相が母相になす仕事量である。以下では後者を緩和エネルギー ΔG_{relax} と呼び、次式で定義する⁽¹¹⁾。

$$\Delta G_{relax} = \int_V \left[-\sigma_{ij}^0 \epsilon_{ij}^c + \frac{1}{2} C_{ijkl} \epsilon_{ij}^c \epsilon_{kl}^c \right] dV \quad (5)$$

固有ひずみは、先に述べたように変態ひずみと塑性ひずみの和として、次式のように定義する。

$$\epsilon_{ij}^0 = \epsilon_{ij}^{trans} + \epsilon_{ij}^p \quad (6)$$

ここで、変態ひずみは m 番目の α 相、すなわち $\phi_m = 1$ となる領域が形成されたときに生じる、変態ひずみ $\epsilon_{ij}^{00}(m)$ と ϕ_m を用いて次式のように定義する。

$$\epsilon_{ij}^{trans} = \sum_{m=1}^N \epsilon_{ij}^{00}(m) \phi_m \quad (7)$$

これにより、任意形状の α 相を内部に有する系の弾性ひずみエネルギーを評価することができる。したがって、応力は以上で定義される弾性ひずみエネルギーより次式で与えられる。

$$\sigma_{ij} = \frac{\delta G_{el}}{\delta \epsilon_{ij}^c} = C_{ijkl} (\epsilon_{kl}^c - \epsilon_{kl}^0) \quad (8)$$

なお、全ひずみならびに結晶塑性理論で評価される塑性ひずみの導出については、以下で述べる。

2.2.1 全ひずみ PFM 理論において全ひずみは、系の巨視的な変形を表現し、座標に依存しない均一ひずみ $\bar{\epsilon}_{ij}^c$ と巨視的な変形には影響しないが、微視領域においては不均一に分布する変動ひずみ $\delta\epsilon_{ij}^c$ の和として次式のように表される。

$$\epsilon_{ij}^c = \bar{\epsilon}_{ij}^c + \delta\epsilon_{ij}^c \quad (9)$$

このとき、変動ひずみについては、巨視的な変形に影響しないと仮定することから、次式を満たすものとする。

$$\int_V \delta\epsilon_{ij}^c dV = 0 \quad (10)$$

巨視的な全ひずみ量である均一ひずみ $\bar{\epsilon}_{ij}^c$ は、系の境界条件、すなわち系に作用する変位や外力により決定される。無限遠方で自由表面がある方向においては系は自由に変形できる。このとき、均一ひずみ $\bar{\epsilon}_{ij}^c$ は緩和エネルギーを最小化し、力学的平衡状態を達成させるひずみ量として次式を満足する⁽¹¹⁾。

$$\frac{\partial \Delta G_{relax}}{\partial \epsilon_{ij}^c} = 0 \quad (11)$$

したがって、式 (5) を用いると、均一ひずみは、

$$\bar{\epsilon}_{ij}^c = \frac{1}{V} \int_V \epsilon_{ij}^0 dV \quad (12)$$

で与えられ、固有ひずみの体積平均値となる。また、無限遠方で系に外部応力 σ_{ij}^a が作用している方向においては、外部応力により生じるひずみが、均一ひずみと等しくなり、次式で表される。

$$\bar{\epsilon}_{ij}^c = C_{ijkl}^{-1} \sigma_{kl}^a \quad (13)$$

さらに、無限遠方で一様な外部付加ひずみ ϵ_{ij}^a が作用している方向では、均一ひずみは外部付加ひずみに等しくなり、次式で与えられる。

$$\bar{\epsilon}_{ij}^c = \epsilon_{ij}^a \quad (14)$$

次に、変動ひずみ $\delta\epsilon_{ij}^c$ は、線形弾性論により次式のように表される。

$$\delta\epsilon_{ij}^c = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) \quad (15)$$

ここで、 u_i は微視領域における変位であり、本研究では局所変位と呼ぶ。局所変位は、緩和エネルギーを最小化し、力学的平衡状態をもたらすように決定される。したがって、局所変位は次式を満足する。

$$\frac{\partial \Delta G_{relax}}{\partial u_i} = 0 \quad (16)$$

式 (16) を満足する局所変位を求めるため、次式に表す緩和エネルギーの第一変分を考える。

$$\delta \Delta G_{relax} = \int_V \left[-\sigma_{ij}^0 \frac{\partial \delta u_i}{\partial x_j} + C_{ijkl} \frac{\partial u_k}{\partial x_l} \frac{\partial \delta u_i}{\partial x_j} \right] dV \quad (17)$$

さらに、ガウスの発散定理を適用し、局所変位は材料の巨視的な変形に影響しないことから材料表面で $\delta u_i = 0$ を仮定すると次式が得られる⁽¹¹⁾。

$$\frac{\delta \Delta G_{relax}}{\delta u_i} = \frac{\partial \sigma_{ij}^0}{\partial x_j} + C_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} \quad (18)$$

式 (18) と式 (16) より、局所変位に関する力学的平衡方程式が得られる⁽¹¹⁾⁽¹³⁾。

$$C_{ijkl} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_j \partial x_l} = C_{ijkl} \frac{\partial \epsilon_{kl}^0}{\partial x_j} \quad (19)$$

本研究では、式 (19) を満たす局所変位 u_i をフーリエ変換を用いて求めるため、局所変位 u_i 、固有ひずみ ϵ_{ij}^0 および変動ひずみ $\delta\epsilon_{ij}^c$ を以下のように表示する。

$$u_i = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\vec{k}} \hat{u}_i(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) d\vec{k} \quad (20)$$

$$\epsilon_{ij}^0 = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\vec{k}} \hat{\epsilon}_{ij}^0(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) d\vec{k} \quad (21)$$

$$\delta\epsilon_{ij}^c = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\vec{k}} \delta\hat{\epsilon}_{ij}^c(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) d\vec{k} \quad (22)$$

ここで、 $\hat{\cdot}$ が付いている諸量は、フーリエ変換の振幅部分を表している。また、 $\vec{k} = (k_1, k_2, k_3)$ は逆空間（フーリエ空間）の波数ベクトルである。式 (20) および式 (21) を式 (19) に代入し、フーリエ変換の振幅部分のみを比較すると、次式が得られる。

$$C_{ijkl} k_j k_l \hat{u}_k(\vec{k}) = -i C_{ijkl} k_j \hat{\epsilon}_{kl}^0(\vec{k}) \quad (23)$$

ここで、標記を簡単にするために $G_{ik}^{-1} = C_{ijkl} k_j k_l$ および $\hat{\sigma}_{ij}^0(\vec{k}) = C_{ijkl} \hat{\epsilon}_{kl}^0(\vec{k})$ を定義すると、式 (23) より $\hat{u}_i(\vec{k})$ が次式で表される⁽¹⁴⁾。

$$\hat{u}_k(\vec{k}) = -i G_{ik} k_j \hat{\sigma}_{ij}^0(\vec{k}) \quad (24)$$

一方、式 (15) に式 (20) を代入すると、次式が得られる。

$$\delta\epsilon_{ij}^c = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\vec{k}} \frac{i}{2} (k_j \hat{u}_i(\vec{k}) + k_i \hat{u}_j(\vec{k})) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) d\vec{k} \quad (25)$$

さらに、式 (25) に式 (24) を代入すると、次式が得られる。

$$\begin{aligned} \delta\epsilon_{ij}^c &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\vec{k}} \frac{1}{2} (n_j \Omega_{mi}(\vec{n}) + n_i \Omega_{mj}(\vec{n})) \\ &\quad n_n \hat{\sigma}_{mn}^0(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) d\vec{k} \end{aligned} \quad (26)$$

ここで, $\vec{n} = \vec{k}/|\vec{k}|$ および $\Omega_{mi}^{-1}(\vec{n}) = C_{ijmn}n_n n_j$ を用いた。よって, 式 (26) と式 (22) を比較すると, 式 (22) 右辺の $\delta \varepsilon_{ij}^c(\vec{k})$ は, $\hat{\sigma}_{ij}^0(\vec{k})$ の関数として次式のように表される。

$$\delta \varepsilon_{ij}^c(\vec{k}) = \frac{1}{2} (n_j \Omega_{mi}(\vec{n}) + n_i \Omega_{mj}(\vec{n})) n_n \hat{\sigma}_{mn}^0(\vec{k}) \quad (27)$$

したがって, 逆空間における変動ひずみ $\delta \varepsilon_{ij}^c(\vec{k})$ が $\hat{\sigma}_{ij}^0$ の関数として求めることができるので, 式 (27) を逆フーリエ変換することで実空間における変動ひずみ $\delta \varepsilon_{ij}^c$ を得ることができる⁽¹⁵⁾。

2.2.2 塑性ひずみ 式 (6) の固有ひずみを評価するために必要な, 塑性ひずみを結晶塑性理論に基づき評価する。すなわち, 塑性ひずみ速度 $\dot{\varepsilon}_{ij}^p$ は, n 個あるすべり系のうち, ある a 番目のすべり系 a におけるせん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(a)}$ および Schmid テンソル $P_{ij}^{(a)}$ を用いて次式で表される⁽¹⁶⁾⁽¹⁷⁾。

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^p = \sum_{a=1}^n P_{ij}^{(a)} \dot{\gamma}^{(a)} \quad (28)$$

ここで,

$$P_{ij}^{(a)} = \frac{1}{2} (s_i^{(a)} m_j^{(a)} + s_j^{(a)} m_i^{(a)}) \quad (29)$$

であり, $s_j^{(a)}$ と $m_i^{(a)}$ は, それぞれすべり系 a のすべり面に対して平行および垂直な方向の単位ベクトルである。これらのベクトルは, 結晶格子とともに回転し, その回転則は変形勾配テンソルの回転成分 F_{ij}^* を用いて, 次式で表されるものとする⁽¹⁸⁾。

$$s_i^{(a)} = F_{ij}^* s_j^{(a)0} \quad (30)$$

$$m_i^{(a)} = m_j^{(a)0} F_{ij}^{*-1} \quad (31)$$

なお, $s_j^{(a)0}$, $m_j^{(a)0}$ は初期方位における各すべり系の単位ベクトルである。このとき, 変形勾配テンソル F_{ij} は,

$$F_{ij} = \delta_{ij} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (32)$$

で表される。したがって, 式 (15) と式 (26) より, 変動ひずみと同様に $\hat{\sigma}_{ij}^0$ の関数として次式で表される。

$$F_{ij} = \delta_{ij} + \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{\vec{k}} n_i \Omega_{mj}(\vec{n}) n_n \hat{\sigma}_{mn}^0(\vec{k}) \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) d\vec{k} \quad (33)$$

式 (28) で必要となるせん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(a)}$ は, Panらの指数則を用いて表現する⁽¹⁹⁾。

$$\dot{\gamma}^{(a)} = \dot{\gamma}_0^{(a)} \frac{\tau^{(a)}}{g^{(a)}} \left| \frac{\tau^{(a)}}{g^{(a)}} \right|^{\frac{1}{m}-1} \quad (34)$$

ここで, $\tau^{(a)}$ はすべり系 a の分解せん断応力であり,

$$\tau^{(a)} = P_{ij}^{(a)} \sigma_{ij} \quad (35)$$

で表される。 $g^{(a)}$ は臨界分解せん断応力であり, 加工硬化挙動を表現する。本研究では, $g^{(a)}$ の発展方程式として, せん断ひずみ γ に依存したモデルを用いる。すなわち, 臨界分解せん断応力の増分は次式で表されるものとする。

$$\dot{g}^{(a)} = \sum_{b=1}^n h_{ab} |\dot{\gamma}^{(b)}| \quad (36)$$

ここで, $\gamma = \sum_{a=1}^n |\gamma^{(a)}|$ で与えられる。 $h_{ab}(\gamma)$ は, 硬化係数であり $h_{ab}(\gamma) = qh(\gamma) + (1-q)h(\gamma)\delta_{ab}$ で表現する。 q は潜在硬化の大きさを表すパラメータである。 $h(\gamma)$ は, 次式を用いる⁽²⁰⁾⁽²¹⁾。

$$h(\gamma) = h_0 \text{sech}^2 \left(\frac{h_0 \gamma}{\tau_s - \tau_0} \right) \quad (37)$$

h_0 , τ_s , τ_0 はそれぞれ, 初期硬化係数, 飽和分解せん断応力, 初期臨界分解せん断応力である。以上を用いて, 塑性ひずみは式 (28) を時間積分することにより得られる。

2.3 時間発展方程式

系の全エネルギーに基づき, 組織の発展を記述する phase field の支配方程式を導出する。 ϕ_i は非保存量の秩序変数であるため, ϕ_i の時間発展方程式は次式の Allen-Cahn 方程式に式 (1) を代入することで得られる。

$$\begin{aligned} \frac{\partial \phi_i}{\partial t} &= -M_\phi \frac{\delta G_{\text{total}}}{\delta \phi_i} \\ &= -M_\phi \left(\frac{\delta G_{\text{chem}}}{\delta \phi_i} + \frac{\delta G_{\text{elast}}}{\delta \phi_i} + \frac{\delta G_{\text{grad}}}{\delta \phi_i} \right) \end{aligned} \quad (38)$$

ここで, M_ϕ は phase field のモビリティである。

3. 解析手順

本研究で構築した, 結晶塑性 Phase-Field モデルを用いた数値解析手順は, 主に下記の 1~8 のステップより構成されている。

1. 初期状態, または前ステップの計算で得られる phase field ϕ_i および塑性ひずみ ε_{ij}^p を用いて, 式 (6) より固有ひずみ ε_{ij}^0 , およびこれをフーリエ変換して得られる $\hat{\varepsilon}_{ij}^0(\vec{k})$ より $\hat{\sigma}_{ij}^0(\vec{k})$ を計算する。
2. 式 (33) を用いて, 変形勾配テンソル F_{ij} , その回転成分 F_{ij}^* を計算し, すべり面での単位ベクトル $s_i^{(a)}$, $m_i^{(a)}$ の回転を式 (30) および (31) より計算する。また, これらを用いて Schmid テンソル $P_{ij}^{(a)}$ を計算する。
3. 外部付加ひずみ ε_{ij}^a , 固有ひずみ ε_{ij}^0 を用いて, 式 (12), (14) より均一ひずみ $\bar{\varepsilon}_{ij}^a$ を計算する。このとき, 引張り変形解析を行う場合は外部負荷ひずみは $\varepsilon_{ij}^a = \varepsilon_{ij}^a n_{\text{step}} \Delta t$ で与える。ここで, ε_{ij}^a , n_{step} および Δt は, それぞれ外部付加変形によるひずみ増分, 計算ステップ数と時間増分である。

Fig. 1 Definition of crystal orientation in two slip systems.

4. 式 (27) を用いて, 変動ひずみのフーリエ変換 $\delta \varepsilon_{ij}^c$ を求め, これを逆フーリエ変換することで, 実空間における変動ひずみ $\delta \varepsilon_{ij}^c(\vec{k})$ を計算する.
5. 以上で求められる各ひずみ量より, 式 (8) で応力 σ_{ij} を計算し, 式 (1) より弾性ひずみエネルギー G_{elast} を求める.
6. 式 (38) より phase field の増分 $\Delta \phi_i$ を求める.
7. 式 (35) より, 分解せん断応力 $\tau^{(\alpha)}$ を計算し, せん断ひずみ速度 $\dot{\gamma}^{(\alpha)}$ を式 (34) より計算する. さらに式 (28) より, 塑性ひずみ速度 $\dot{\varepsilon}_{ij}^p$ を求める.
8. 塑性ひずみ ε_{ij}^p および phase field ϕ_i を時間積分することにより更新し, 次の計算ステップの入力情報とする.

以上の手順により, 組織発展に伴う塑性変形や塑性変形による結晶方位変化を評価できる. また, 平衡方程式を解き局所変位および, ひずみを求める過程でフーリエ変換を用いており, 収束計算を必要としないため高速な数値解析が可能である.

4. 解析モデル

本研究では, はじめに前章で導出した結晶塑性 Phase-Field モデルを用いて結晶方位に依存した塑性変形挙動を解析できることを示すため, 単結晶の単軸引張り変形シミュレーションを行う. ここでは, 組織発展すなわち ϕ_i の時間発展は解析せず, 系に外部変形を与えて巨視的な応力-ひずみ関係を評価する. ついで, 固相変態による組織形成シミュレーションとして, β 母相における α 相成長シミュレーションを行い, 組織形成に伴う弾性および塑性変形挙動を解析する.

数値シミュレーションの解析領域は一辺 $L = 200 \mu\text{m}$ の 2 次元正方形領域とし, 128×128 の規則差分格子で分割する. したがって, 差分格子間隔は $\Delta x_1 = \Delta x_2 = 1.56 \mu\text{m}$ である. 時間発展方程式 (38) は時間, 空間と

Table 1 Physical and simulation parameters.

Mobility	M_ϕ	1.0
Gradient energy coefficient	κ	1.0^{-9}
Chemical driving force	$\Delta f [\text{J/m}^3]$	6.0×10^7
Young's modulus	$E [\text{GPa}]$	77.0
Poasson's ratio	ν	0.375
Referential shear strain rate	$\dot{\gamma}_0^{(\alpha)} [1/\text{s}]$	0.1
Strain rate sensitivity factor	m	0.05
Initial hardening coefficient	$h_0 [\text{MPa}]$	250
Potential hardening coefficient	q	1.2
Saturated resolved shear stress	$\tau_s [\text{MPa}]$	132
Initial resolved shear stress	$\tau_0 [\text{MPa}]$	75
Time increment	$\Delta t [\text{s}]$	0.002

もに前進差分法により離散化し, 数値解析する. また, 応力場の解析には, 高速フーリエ変換を用いる. このとき, 境界条件は, 全方向周期境界条件を適用する. また, 図 1 に示す 2 すべり系の平面ひずみ状態を仮定し, 解析領域 x_1 軸方向と $\langle 11-2 \rangle$ 方向がなす角度を結晶方位 θ とする. 後述するように, α 相と β 相は格子定数は異なるが, すべり系の数およびその他の物性値やパラメータは同一で, 表 1 に示す値を用いる.

単結晶の単軸引張り変形シミュレーションでは, 解析領域内すべての差分格子点で $\phi_i = 0$ とし, さらに同一結晶方位を与えることで単結晶を表現する. 単結晶の結晶方位を種々に変化させて, 引張り変形解析を行うことにより, 結晶方位に依存した初期降伏応力を評価する. このとき, 外部付加変形は x_2 方向の無限遠方で作用しているものとし, 外部付加変形を与えない方向は無限遠方で自由表面とし, 均一ひずみは式 (12) で与える.

α 相成長シミュレーションにおいては, α 相の格子定数が β 相よりも大きく, β 相から α 相への相変態によって等方的な膨張成分を有する変態ひずみが, 結晶方位とは無関係に生じるものとする. すなわち, 式 (7) の変態ひずみは次式で与えられる.

$$\varepsilon_{ij}^{00}(m) = R_{ik}(\theta) R_{jl}(\theta) \varepsilon_{kl}^{000}(m) \quad (39)$$

ここで, $R_{ij}(\theta)$ は結晶方位を表現するための回転マトリクス, $\varepsilon_{11}^{000}(m) = \varepsilon_{22}^{000}(m) = 0.002$, $\varepsilon_{12}^{000}(m) = 0$ である. なお, α 相と β 相で結晶方位が異なる場合には, θ は $\phi_i = 0.5$ の位置でステップ関数状に変化するものとした.

本研究では, α 相単一核が解析領域に形成し成長する過程と解析領域内にランダムに核形成した 3 つの α 相が成長し, 結晶粒界を形成する過程のシミュレー

Fig. 2 Stress-strain curves for uniaxial tensile loading of single crystal with different crystal orientations.

Table 2 Initial yield stress depending on crystal orientation

θ	0°		15°		30°		45°		60°	
ψ _i	ψ ₁	ψ ₂	ψ ₁	ψ ₂	ψ ₁	ψ ₂	ψ ₁	ψ ₂	ψ ₁	ψ ₂
	120°	60°	105°	45°	90°	30°	75°	15°	60°	0°
F(ψ _i)	2.3	2.3	4.0	2.0	∞	2.3	4.0	4.0	2.3	∞
σ _{y0} [MPa]	172.5	172.5	300.0	150.0	∞	172.5	300.0	300.0	172.5	∞

シオンを行う。そして、それぞれに対し、弾性変形のみが生じる系と弾性変形および塑性変形が生じる系でのシミュレーションを行い、組織形成過程に塑性変形が及ぼす影響を検討する。初期 α 相の半径は $r = 4\Delta x_1 = 6.25 \mu\text{m}$ とし、初期状態においては α 相以外の領域は、すべて均一な β 母相とする。

5. 解析結果と考察

5.1 単結晶の単軸引張り変形挙動 図 2 に、異なる結晶方位を有する単結晶の引張り変形解析で得られた、巨視的相当応力 $\bar{\Sigma}$ - 均一ひずみ $\bar{\epsilon}_{22}^c$ 曲線を示す。なお、ここではひずみ速度依存性を可能な限り無視するため $\dot{\epsilon}_{22}^a = 0.001 \text{ s}^{-1}$, $m = 0.0005$ とした。また、本研究では、巨視的相当応力 $\bar{\Sigma}$ は、系の巨視的な変形を表す均一ひずみ $\bar{\epsilon}_{ij}^c$ および応力 Σ_{ij} を用いて次式で評価する。

$$\bar{\Sigma} = \frac{1}{2} \left\{ (\Sigma_{11} - \Sigma_{22})^2 + (\Sigma_{22} - \Sigma_{33})^2 + (\Sigma_{33} - \Sigma_{11})^2 \right\} + 3\Sigma_{12}^2 \quad (40)$$

ここで、

$$\Sigma_{ij} = C_{ijkl} E_{kl}^{el} \quad (41)$$

$$E_{ij}^{el} = \bar{\epsilon}_{ij}^c - \frac{1}{V} \int_V \epsilon_{ij}^p dV \quad (42)$$

を用いた。一方、単結晶の初期降伏応力 σ_{y0} は、結晶方位と初期臨界分解せん断応力に依存し、次式で表さ

Fig. 3 Evolutions of (a) phase field ϕ_1 and (b) equivalent stress during the growth of α phase with elastic deformation.

れる。

$$\sigma_{y0} = F(\psi_i) \tau_0 = \frac{2}{|\sin 2\psi_i|} \tau_0 \quad (43)$$

ここで、 ψ_i はすべり系 i のすべり面方向と引張り方向 (x_2 軸方向) とのなす角度である。式 (43) から、 σ_{y0} と ψ_i の関係は、表 2 のようにまとめられる。すなわち、結晶方位に依存して ψ_i が変化し、各結晶方位に対して 2 つのすべり系のうち $F(\psi_i)$ の小さなすべり面において先に塑性変形が生じることで、初期降伏応力が決定される。図 2 に示した応力-ひずみ曲線においても、結晶方位に依存して初期降伏応力が変化しており、表 2 で示した結晶方位と初期降伏応力の関係が正確に表現されていることが確認できる。以上より、本研究の結晶塑性 Phase-Field モデルを用いて、材料の塑性変形の解析が可能であり、巨視的な応力-ひずみ関係において結晶方位に依存した初期降伏応力を正確に評価できることを確認できた。

5.2 単一 α 相の成長と塑性変形挙動 図 3(a) および (b) は、弾性変形のみが生じる系での phase field ϕ_1 の時間変化すなわち α 相の成長過程、およびこのときの相当応力の時間変化を示している。ここでは、β 母相と α 相の結晶方位はともに $\theta = 0^\circ$ とした。β 相から α 相への相変態により等方的な膨張成分の変態ひずみが生じる。したがって、界面近傍の β 相で応力が増加し、高い応力を示す領域が α 相の成長とともに移動していることがわかる。

一方、図 4(a) および (b) は、弾性変形および塑性変形が生じる系での phase-field ϕ_1 および相当応力の時間変化を示している。図中の実線は、 $\phi_1 = 0.5$ を示している。図 3 に示した結果と同様に、α 相の成長により界

Fig. 4 Evolutions of (a) phase field ϕ_1 (b) equivalent stress and (c) shear strain during the growth of α phase with elastic and plastic deformations.

Fig. 6 Evolutions of (a) phase field ϕ_1 , (b) equivalent stress and (c) shear strain during the growth of α phase with elastic and plastic deformations. Crystal orientation of β phase is $\theta = 15^\circ$.

Fig. 5 Evolutions of shear strain on (a) slip system 1 and (b) slip system 2 during the plastic deformation.

面近傍で応力は増加するが、その値は先に示した結果より小さいことがわかる。図 4(c) に、せん断ひずみ γ の時間変化を示す。塑性変形が生じる系においては、 α 相の成長によって界面近傍の応力が降伏応力より大きくなった箇所で塑性変形が生じている。さらに、塑性変形は常に界面近傍で生じており、 α 相の成長により界面が移動することで α 相の内部に塑性変形領域が

取り残されている。このように界面近傍の β 相で塑性変形が生じることで、加工硬化が生じるため、弾性解析に比べて界面近傍の応力は小さく不均一に分布していることがわかる。

本研究では、2 すべり系を仮定したため、解析領域 x_1 軸から反時計周りに $\pm 15^\circ$, $\pm 75^\circ$, $\pm 105^\circ$ および $\pm 165^\circ$ の方向に塑性変形が集中して生じている。この塑性変形挙動についてより詳細な検討を行うため、図 5(a) および (b) に各すべり系のせん断ひずみ $\gamma^{(a)}$ ($a = 1, 2$) の時間変化を示す。 α 相の成長によって、等方的な膨張が生じるので、界面近傍の β 相には界面の法線方向に圧縮応力が生じる。このとき、 β 母相の結晶方位は $\theta = 0^\circ$ であるので、すべり系 1 と 2 のすべり面方向、すなわち $s_i^{(1)}$ と $s_i^{(2)}$ の方向はそれぞれ x_1 軸方向と 30° , -30° の角度をなす。したがって、例えば図 5(a) に示すように、界面の法線方向が 15° , 105° , -75° および -165° となる界面では、界面の法線方向に生じている圧縮応力の方向とすべり面 1 のすべり方向とが 45° の角度をなす。したがって、これらの界面近傍では、すべり面上のせん断応力が最大となり、大きな塑性変形が生じることがわかる。これと同様の説明で、界面の法線方向が各すべり面方向に対して 45° の角度をなす箇所に

Fig. 7 Evolutions of equivalent stress during growth of multiple precipitates with (a) elastic deformation, (b) plastic deformation and (c) shear strain during the plastic deformation.

において塑性変形が集中し、図 4(c) のようなせん断ひずみ分布となることが理解できる。次に、 β 母相の結晶方位が $\theta = 15^\circ$ であり、 α 相との結晶方位差が 15° の場合の α 相成長シミュレーションの結果を図 6 に示す。結晶方位差 0° の場合と同様に、 α 相の成長に伴って界面近傍の β 相で応力が集中していることがわかる。しかしながら、塑性ひずみの集中する箇所は、 β 相の結晶方位に依存して変化している。すなわち、 β 相の結晶方位が 15° であるため、塑性変形が集中する箇所も図 4(c) に示した分布を 15° 回転させたものとなっている。なお、 x_1 軸と $0^\circ, 90^\circ, 180^\circ$ および 270° をなす方向で塑性ひずみが大きくなっているのは周期境界条件のためである。

以上のように、本研究で提案する結晶塑性 Phase-Field モデルを用いることで、相変態による組織形成のみならず、変態ひずみによる界面での応力増加や母相での塑性変形挙動を結晶塑性理論に基づき解析可能であることがわかる。

5.3 複数の α 相の成長による塑性変形挙動 複数の α 相が成長し、互いに衝突することで結晶粒界を形

成する過程での応力変化や塑性変形挙動を解析する。図 7(a) および (b) に、それぞれ弾性変形のみと弾性変形と塑性変形が生じる系での相当応力の変化を示す。図中に β 母相と各 α 相の結晶方位を示す。ここで、実線は $\phi_i = 0.5$ ($i = 1, 2, 3$) を示している。単一 α 相の成長過程で見られたように、 α 相の成長に伴って、界面近傍で応力が増加し、高い応力の領域が移動している。複数の α 相が成長する場合には、 α 相の間で特に高い応力が生じていることがわかる。さらに、 α 相が互いに衝突すると結晶粒界を形成しており、結晶粒間の応力は大きく減少している。弾性解析においては、解析領域全域が α 相となると、解析領域内の応力は零にまで減少していることがわかる。これは系の巨視的な境界条件として、無限遠方で自由表面としており、巨視的な形状変化によって応力場を緩和したためである。

一方、塑性変形が生じる系においては、 α 相の成長による界面近傍での応力増加と塑性変形による応力緩和が同時に生じているため、界面近傍や α 相に挟まれた β 相における応力は弾性解析の場合よりも小さい。図 7(c) に、塑性変形で生じたせん断ひずみ γ の時間変化

を示す. 単一 α 相の成長過程で観察されたように, 結晶方位に依存して界面近傍の β 母相で塑性変形が生じている. 特に, α 相同士が衝突する際には, 巨視的な形状変化とともに, 界面近傍で塑性変形を生じることで α 粒間で生じていた高い応力を緩和させている. したがって, β 母相がすべて α 相に変態した後, α 相の多結晶構造内部には残留応力が生じていることがわかる. この結果から, 提案する Phase-Field モデルを用いて, 相変態による多結晶構造の形成や結晶粒界の形成に伴う応力の変化, さらに多結晶構造形成後の材料内部の残留応力の発生機構を結晶塑性理論の観点から評価可能であることが示される.

6. 結 言

本研究では, 相変態による組織発展とそれに伴う塑性変形挙動を結晶塑性理論に基づき解析するために, 新たに結晶塑性 Phase-Field モデルを提案した. 本モデルでは塑性ひずみを結晶塑性理論で評価するとともに, フーリエ変換を用いた弾性ひずみエネルギー評価法である PFM 理論を用いるため, 高速な応力解析および組織形成シミュレーションが可能である. さらに本研究では, 構築した結晶塑性 Phase-Field モデルを用いて, 単結晶の単軸引張り変形シミュレーションおよび相変態による析出物成長のシミュレーションを行った. その結果, 本モデルを用いて結晶方位に依存した塑性変形挙動を評価可能であり, 相変態による析出物の成長や多結晶構造の形成過程における界面近傍での応力集中や塑性変形挙動を結晶塑性理論に基づき解析できることを示した. 今後は, 本研究で構築した結晶塑性 Phase-Field モデルをマルテンサイト変態や動的再結晶のような組織発展と材料の塑性変形が同時に進行する実際を系のシミュレーションに適用し, 方位変化や転位密度変化を含めたより詳細な組織形成シミュレーションを行うことを課題とする.

謝 辞

本研究は文部科学省科学研究費および日本学術振興会特別研究員奨励費の補助のもとに行われた. ここに記して謝意を表する

文 献

- (1) Kobayashi, R., Modeling and Numerical Simulations of Dendritic Crystal Growth, *Physica D*, Vol.63, (1993), pp.410-423.
- (2) Takaki, T., Fukuoka, T. and Tomita, Y., Phase-Field Simulation During Directional Solidification of A Binary Alloy Using Adaptive Finite Element Method, *Journal of Crystal Growth*, Vol.283, (2005), pp.263-278.
- (3) Takaki, T., Hirouchi, T., Hisakuni, Y., Yamanaka, A. and Tomita, Y., Multi-Phase-Field Model to Simulate Microstructure Evolutions during Dynamic Recrystallization, *Materials Transactions*, Vol.49, (2008), pp. 2559-2565.
- (4) Yamanaka, A., Takaki, T. and Tomita, Y., Multi-Phase-Field Modeling of Diffusive Solid Phase Transition in Carbon Steel during Continuous Cooling Transformation, *Journal of Crystal Growth*, Vol.310, (2008), pp 1337-1342.
- (5) Biner, S. B. and Hu, S. Y., Simulation of Damage Evolution in Composites: A Phase-field Model, *Acta Materialia*, Vol.57, (2009), pp.2088-2097.
- (6) Wang, Y. U., Jin, Y. M., Cuitino, A. M. and Khachaturyan, A. G., Phase Field Microelasticity Theory and Modeling of Multiple Dislocation Dynamics, *Applied Physics Letters*, Vol. 78, (2001), pp.2324.
- (7) Uehara, T., Fukui, M. and Ohno, N., Elasto-plastic Simulation of Stress Evolution during Grain Growth using a Phase Field Model, *Journal of Crystal Growth*, Vol.300, No.2 (2007), pp.530-537.
- (8) Guo, X. H., Shi, S-Q. and Ma, X. Q., Elastoplastic Phase Field Model for Microstructure Evolution, *Applied Physics Letters*, Vol.87, (2005), pp.221910
- (9) Guo, X. H. , Shi, S. Q., Zhang, Q. M. and Ma, X. Q., An Elastoplastic Phase-field Model for the Evolution of Hydride Precipitation in Zirconium. Part I: Smooth specimen, *Journal of Nuclear Materials*, Vol.378, (2008), pp.110-119.
- (10) Yamanaka, A., Takaki, T. and Tomita, Y., Elastoplastic Phase-Field Simulation of Self- and Plastic Accommodations in Cubic-Tetragonal Martensitic Transformation, *Materials Science and Engineering A*, Vol.491, (2008), pp.378-384.
- (11) Khachaturyan, A. G., *Theory of Structural Phase Transformations in Solids*, (1983), pp.198-212, Wiley and Sons Inc., NY.
- (12) Zhang, W, Jin, Y. M. and Khachaturyan, A. G., Phase Field Microelasticity Modeling of Heterogenous Nucleation and Growth in Martensitic Alloys, *Acta Materialia*, Vol.55, (2007), pp.565-574.
- (13) Kato, M., *Introduction to Dislocation Theory* (in Japanese), (1999), pp.187, Shokabo.
- (14) Hu, S. Y. and Chen, L. -Q., A Phase-field Model for Evolving Microstructures with Strong Elastic Inhomogeneity, *Acta Materialia*, Vol.49, (2001), pp.1879-1890.
- (15) Koyama, T. and Onodera, H., Phase-Field Simulation of Microstructure Changes in Ni₂MnGa Ferromagnetic Alloy Under External Stress and Magnetic Fields, *Materials Transactions*, Vol.44, No.12 (2003), pp.2503-2508.
- (16) Hill, R. and Rice, J. R., Constitutive Analysis of Elastic-plastic Crystals at Arbitrary Strain, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol.20, (1972), pp.401-413
- (17) Asaro, R. J. and Rice, J. R., Strain Localization in Ductile Single Crystals, *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, Vol.25, (1977), pp.309-338.

- (18) Peirce, D., Asaro, R. J. and Needleman, A., Material Rate Dependence and Localized Deformation in Crystalline Solids, *Acta Metallurgica*, Vol.31, (1983), pp.1951-1976.
 - (19) Pan, J. and Rice, J. R., Rate Sensitivity of Plastic Flow and Implications for Yield-surface Vertices, *International Journal of Solids and Structures*, Vol.19, (1983), pp. 973-987.
 - (20) Needleman, A., Asaro, R. J. and Lemonds, J., Finite Element Analysis of Crystalline Solids, *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, Vol.52, (1985), pp.689-708.
 - (21) Tomita, Y., *Numerical Elastic-Plastic Mechanics* (in Japanese), (1990), pp.185-189, Yokendo Ltd.
-